

CO吸附在过渡金属铂表面的微观动力学研究

贾红英; 王泽新

山东师范大学化学化工与材料科学学院, 济南 250014

摘要:

建立了处理双原子分子-表面相互作用的推广的LEPS势. 借助推广的LEPS势, 系统研究了一氧化碳分子在铂低指数表面吸附的动力学特性, 重现了低指数表面的分子吸附热、吸附几何及本征振动等实验数据; 鉴定了某些不合理的文献信息, 预测了实验尚未探测到的重要信息: 预测到Pt(100)表面四重洞位的C—O伸缩振动频率为 $1\ 962.60\text{ cm}^{-1}$; 预测到Pt(110)表面吸附态的C—O及C—Pt键长分别为115.1、147 pm.

关键词: 推广的LEPS势 吸附 过渡金属 低指数表面

收稿日期 2003-06-18 修回日期 2003-09-26 网络版发布日期 2004-02-15

通讯作者: 王泽新 Email: wangzexin@sdu.edu.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

[PDF\(1585KB\)](#)

服务与反馈

[把本文推荐给朋友](#)

[加入我的书架](#)

[加入引用管理器](#)

[引用本文](#)

[Email Alert](#)

[文章反馈](#)

[浏览反馈信息](#)

本文关键词相关文章

▶ [推广的LEPS势](#)

▶ [吸附](#)

▶ [过渡金属](#)

▶ [低指数表面](#)

本文作者相关文章

▶ [贾红英](#)

▶ [王泽新](#)